

**Использование данных ИК- и ЯМР-спектров для оценки устойчивости енольной формы замещенных 3-арилпиразол-5-онов – важных промежуточных веществ для получения экстрагентов ряда 4-ацилпиразолонов**

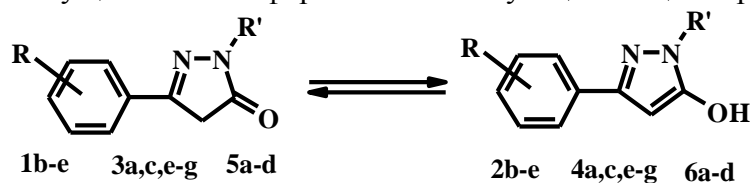
Ковганко В.Н.<sup>1</sup>, Ковганко Н.Н.<sup>2</sup>, Зинькова Т.Н.<sup>1</sup>, Дорошук Д.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный технологический университет, г. Минск

<sup>2</sup> Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

*E-mail: umkauhanka@belstu.by*

Интерес к замещенным 4-ацилпиразолонам связан с их способностью образовывать устойчивые хелатные комплексы с катионами металлов. Это позволяет использовать соединения данного ряда в качестве эффективных экстрагентов для выделения и определения катионов металлов. Устойчивость соответствующих хелатов и эффективность экстракции зависит от способности 4-ацилпиразолонов существовать в форме соответствующих 4-ацилпиразол-5-олов.



**a R= H; b R= 4-OC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>; c R=4-OC<sub>7</sub>H<sub>15</sub>; d R=4-OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub>; e R=4-F; f R=2-F; g R=3-F,4-OMe**

**1,2 R'= H;    3,4 R'=Ph;    5,6 R'=4-OMe-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>**

Соединения ряда 3-арилпиразолонов являются ключевыми промежуточными веществами при получении 4-ацилпиразолонов. Нашей исследовательской группой синтезирован ряд 3-арилпиразолонов **1,3** и **5**. Известно, что для замещенных пиразол-5-онов характерна кето-енольная таутомерия и данные вещества могут существовать в виде 5-гидроксипиразолов. При проведении синтетического исследования для доказательства строения соединений **1,3** и **5** нами использовались данные ИК и ЯМР спектроскопии. При этом используя ИК и ЯМР спектры синтезированных веществ можно оценить относительную устойчивость соответствующих енольных форм **2,4** и **6** для кристаллических соединений и растворов. Это важно при планировании направленного синтеза новых 4-ацилпиразолонов, так как позволяет оценить влияние различных групп при атоме 1-*N* (*R'*) и в 3-арильном заместителе (*R*) на способность к стабилизации енольной формы.

По данным ИК спектров для твердых образцов в таблетках КВг о наличии таутомерных форм судили по наличию интенсивных полос поглощения  $C=O$  связи в области  $1620-1750\text{ см}^{-1}$ . О наличии енольной формы в растворах по данным ЯМР  $^1H$  спектров судили по наличию синглета  $4-CH$  в области  $\delta\ 5.90-6.35$  м.д.

Установлено, что вещества **1,3** в твердом состоянии существуют преимущественно в виде соответствующих кетонов. Енольная форма для твердых образцов обнаружена для соединения **3f**. В свою очередь кристаллические 1-(4-метокси)фенил замещенные соединения существуют в основном в виде енолов **6**. Судя по данным ЯМР  $^1\text{H}$  спектров растворов изученных соединений в дейтеропиридине и дейтеродиметилформамиде более стабильна енольная форма. Для растворов в дейтеродиоксане, дейтероацетонитриле и дейтероацетоне характерно равновесие с преобладанием кетонной формы (от 2:1 до 4:1).